

転位と粒界の相互作用に関する分子動力学解析

Molecular Dynamics Study of Dislocation and Grain Boundary Interactions

下川智嗣

Tomotsugu Shimokawa

金沢大学
理工研究域 機械工学系
准教授

1 はじめに

結晶性材料の強度や破壊現象は、転位や亀裂という格子欠陥に強く支配される。転位論や破壊力学は、そのような欠陥を連続体中の特異点として取り扱い、その特異点に生じる力を力学的に求めることができる。しかしながら、特異点に生じる抵抗力（パイエルス応力や転位が粒界を通過するときの抵抗力、亀裂進展の抵抗力など）や、特異点を生成するために必要な力（亀裂先端や粒界から転位を放出するために必要な力）を、原子レベルの情報を用いずに上記の理論の枠組で見積もる事は容易ではない。このことが、ナノスケールの内部組織を有する材料の力学特性が未解明になっている一つの要因であると考えられる。

原子シミュレーションは（個々の原子の運動を直接取り扱うため、対象とする空間や時間に計算機パワーの制限を受けるが）、上記に示す格子欠陥の発展を表現できる有力な道具である。そこで本稿では、著者らがこれまでに原子シミュレーションの一つである分子動力学法により観察した転位と粒界の相互作用を説明し、それに基づいて行った結晶性材料の強度・破壊・延性特性に対する検討を紹介する。

2 粒内転位源と粒界転位源

結晶性材料の塑性変形は転位の運動により生じるため、運動転位と障害物の相互作用を考えることが材料強化の一つの手段である。このとき先述した理論では、運動転位は既に結晶内に存在していることを前提としている。しかし、組織がナノスケールオーダーまで緻密化されると、運動転位と障害物の抵抗力よりも、転位を生成するために必要な力の方が大きくなる可能性がある。このとき、材料強度は後者が律速することになる。そこで、ここでは粒内・粒界転位源を原子モデルにより表現し、その臨界応力を比較する。対象としてい

る材料はアルミニウムであり、原子間相互作用は、MishinらのEAM (Embedded-Atom Method) ポテンシャルにより表現する¹⁾。

2.1 Frank-Read源²⁾

ナノサイズのフランク・リード源は図1 (b) の挿入図に示すように、完全結晶中のある $\{110\}$ 面に2層余分な $\{110\}$ 面を導入することで表現する。つまり、 $\{112\}$ 面をすべり面に持つ不動転位にピン止めされた刃状転位対をFR源として考える。しかしながら、この不動転位は、局所的にすべり面を変更し運動するためピン止めの効果が不十分であった。そこで、不動転位の代わりに円柱型の空孔を用いる。さらに、張出中に交差すべりを生じさせないように、転位すべり面の隣接原子面の運動を一部制御する。転位の張出距離を L とする。図1 (a) に $L=4\text{nm}$ における転位の張出の様子を示す。これより、張り出した転位は、完全なループ転位となり、転位が増殖していることがわかる。図1 (a) 中の状態bが臨界状態であり、このときのせん断応力 τ_x を臨界応力とする。図1 (b) に L と臨界応力の関係を示す。破線は単純線張力モデル³⁾、一点鎖線は張出を多角形で表現したモデル⁴⁾、実線は転位間相互作用を考慮した張出モデル^{5,6)}である。以上の結果より、 $L=4\text{nm}$ という非常に小さい張出距離でも連続体モデルとよい一致を示していることが確認でき、転位芯の張出に対する影響は小さいことが推測できる。

2.2 粒界転位源⁷⁾

$\langle 112 \rangle$ 軸対称傾角粒界から転位が放出する現象を考える。図2 (a) (b) (c) に $\Sigma 21$ 、 $\Sigma 11$ 、 $\Sigma 15$ 粒界の構造を示す。各粒界構造は、構造ユニットが $|BBA|$ 、 $|B|$ 、 $|BBC|$ の周期で構成されている。 $\Sigma 11$ 粒界は大きな粒界エネルギーカスプを示しており、安定な粒界である。この $\Sigma 11$ 粒界を参照構造とし、そのDSC格子を用いると、 $\Sigma 11$ 粒界よりも方位差が

小さな $\Sigma 21$ 粒界では、粒界転位がA構造ユニットに存在しており、また $\Sigma 11$ 粒界よりも方位差が大きな $\Sigma 15$ 粒界では、粒界転位がC構造ユニットに存在していることになる。なお、 $\Sigma 21$ と $\Sigma 15$ に存在する粒界転位のバーガースペクトルは反対向きとなる。

上記で述べた粒界転位は、転位源として機能する。しかしその幾何学的な関係より、強い異方性を示す。図2 (d) は $\Sigma 21$ 粒界に対して垂直方向に圧縮変形を加えたときの結果である。粒界に存在するA構造ユニットから転位が放出し、 $\Sigma 21$ 粒界は $\Sigma 11$ 粒界へ構造遷移していることが確認できる。一方で、図2 (f) は $\Sigma 15$ 粒界に対して引張変形を加えたとき

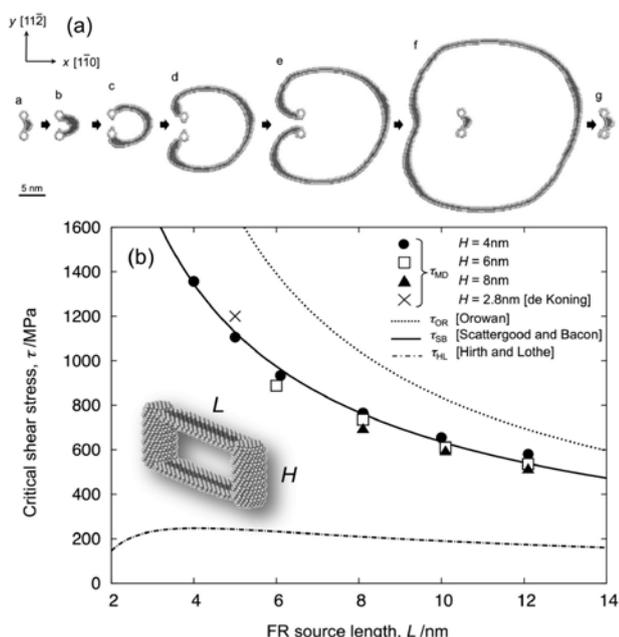


図1 (a) 張出長さ4nmのFrank-Read源の増殖過程。(b) 張出長さ L と臨界応力の関係²⁾

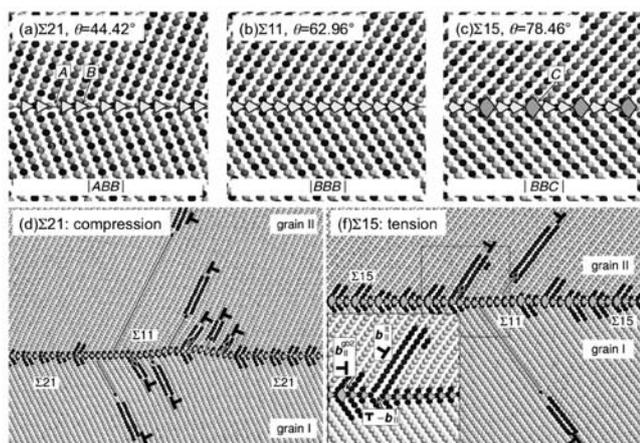


図2 $\langle 112 \rangle$ 対称傾角粒界構造。(a) $\Sigma 21$ 、(b) $\Sigma 11$ 、(c) $\Sigma 15$ 。(d) 圧縮負荷時における $\Sigma 21$ 粒界からの転位の放出。(e) 圧縮負荷時における $\Sigma 11$ 粒界からの転位の放出。(f) 引張負荷時における $\Sigma 15$ 粒界からの転位の放出

の結果であり、 $\Sigma 21$ 粒界の場合とは反対符号の転位をC構造ユニットから放出し、 $\Sigma 15$ 粒界は $\Sigma 11$ 粒界へ構造遷移していることがわかる。このように、ある安定な参照粒界構造からの方位差を緩和するために導入された粒界転位は、その粒界構造を参照粒界構造に戻そうとする外力が生じたときに、粒内に放出することが可能である。

2.3 粒内転位源と粒界転位源の比較

図3に粒内・粒界転位源を起動するために必要な臨界応力と特徴長さの関係と比較する²⁾。粒内転位源はFrank-Read源を考える。転位の張出距離を特徴長さ S とする。粒界転位源として、 $\langle 112 \rangle$ 傾角粒界を用いる。粒界方位差は 34° から 85° までの対応粒界とする。2.2節で述べたように方位差が 63° においてエネルギー的に安定な $\Sigma 11$ 粒界が存在するので、これよりも方位差が小さい(大きい)粒界は圧縮(引張)変形で容易にA(C)構造ユニットから転位を放出する。粒界転位の間隔 h を特徴長さ S とする。また参考までに完全結晶における均質転位形成に必要な応力も併せて示す。実線は弾性論を用いたFR源の臨界応力値である⁶⁾。粒界転位源についても、粒界転位間の距離が小さくなるにつれて起動応力が大きくなることを確認できる。これは、粒界転位間の弾性相互作用に起因していると考えられる。結果として、今回の場合、粒内に $L > 5$ nmのFR源が存在すれば、粒界から転位は放出しにくいことが推測できる。しかしながら、多結晶体中の応力場は均質ではないので、今後、粒界レッジや三重点近傍の応力集中を考慮する必要がある。

2.1節で述べたように粒内転位源を原子モデルで表現できるようになったので、隣接する結晶粒間の塑性変形の伝播メカニズムが解析できる。図4は、粒径80nmの結晶粒中に $L = 5$ nmのFR源を導入して γ_{zx} のせん断変形シミュレーションの結果である⁸⁾。まず粒内のFR源が起動し、塑性変形が開始

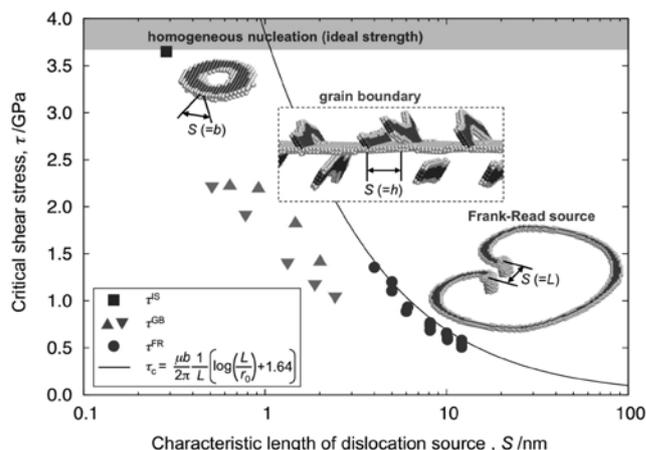


図3 粒内転位源と粒界転位源の臨界応力と特徴長さ S の関係²⁾

することがわかる (図4 (ii))。その後、粒界に侵入した転位は粒界を通過し、塑性変形を伝播している (図4 (iv))。明らかに粒界方位差に応じて転位の通過抵抗力は変化するので、もしその抵抗力が大きい場合は、隣接粒内に存在するFR源が起動することで塑性変形が伝播することが推測できる。つまり、粒界の特性や粒内の転位源の大きさに応じて、i) 粒内転位源→粒内転位源、ii) 粒内転位源→粒界通過などに塑性変形の伝播機構が変化することになる。この伝播機構は多結晶体の降伏現象に密接に関係しており、今後の検討課題である。

3 破壊靱性と粒界の関係

一般的に、パイエルス応力の大きな結晶性材料の降伏応力と破壊靱性値はトレードオフの関係であり、降伏応力の増加に伴い、破壊靱性値は低下することが知られている。しかし

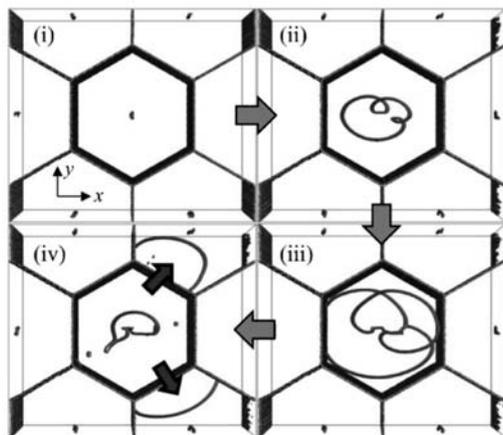


図4 粒径80nmの多結晶体の塑性変形の伝播過程⁹⁾。粒内に存在する張出長さ5nmのFR源が最初に起動し、粒界に侵入する。その後、粒界から転位が放出される

ながら、結晶粒を微細化するで、低温における破壊靱性値が向上することが報告されている⁹⁾。これまでの実験により、脆性延性遷移と転位移動に対するそれぞれの活性化エネルギーはよく対応していることから、脆性延性遷移挙動を律速している素過程は転位のモビリティであることが報告されているが¹⁰⁾、超微細粒材中の転位のモビリティは粗大粒材のものと同じであることが確認されている⁹⁾。つまり粒界を多く含む超微細粒材の破壊現象を理解するためには、破壊に対する粒界の役割を理解することが重要である。

粒界が転位の障害物としてのみ機能する場合、従来の遮蔽理論¹¹⁾だけでは、上記の実験結果を説明できない。そこで、ここでは2.2節で示した引張負荷により転位を放出しやすい粒界を採用し、粒内亀裂と界面亀裂近傍の塑性変形に対する粒界の影響を検討する。なお、解析対象は2章と同じアルミニウムである。

3.1 粒内亀裂¹²⁾

亀裂上方に $\Sigma 15$ 粒界を配置し、引張変形シミュレーションを実施する。格子欠陥の発展を図5 (a) に示す。原子の色は、初期状態からの格子回転量を意味している。まず、亀裂が強い応力集中源となるため、亀裂から転位が発生し、その転位が粒界に侵入する。この転位により、亀裂先端は遮蔽されるため応力集中能力が低下する。一方で、粒界近傍では侵入した格子転位を起点に、粒界から多数の転位が発生する。つまり、転位源が亀裂から粒界に遷移していることになる。粒界から転位 (亀裂先端にとっては反遮蔽) を放出することで、粒界構造は $\Sigma 15$ 粒界から $\Sigma 11$ 粒界へ遷移し、その境界には回位¹³⁾と呼ばれる回転型の格子欠陥が形成することになる。

図5 (b) は、予め粒界に回位対を配置したときの負荷方向の垂直応力場を示している。なお、ここで示している状態は

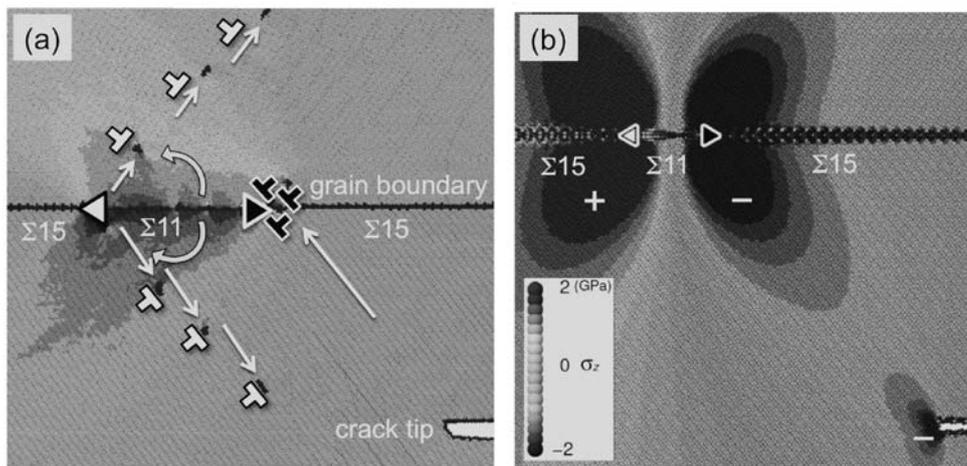


図5 超微細粒材の破壊靱性が向上するメカニズム。(a) 粒界から転位が放出することで、回位対が形成される。(b) 回位対により亀裂先端の力学場は遮蔽される

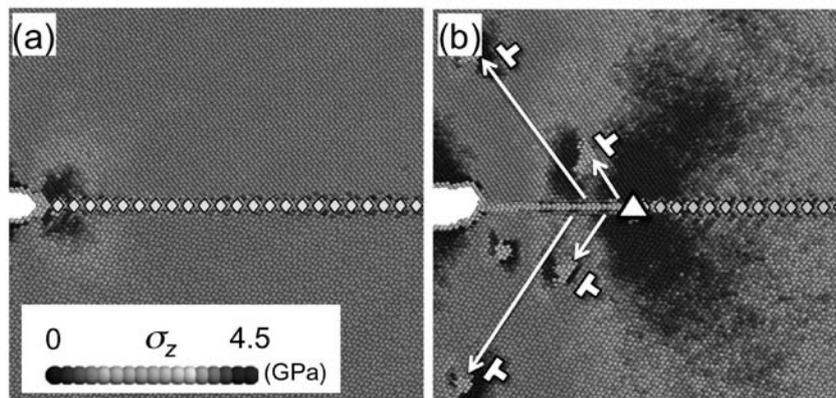


図6 界面亀裂の遮蔽。粒界から転位が放出することで、亀裂先端の応力集中領域が移動する、C構造ユニットのみ示す

無負荷時の状態である。これより、無負荷時において、亀裂先端が圧縮応力場になっていることが確認できる。つまり、粒界に存在する回位対により亀裂先端は確かに遮蔽されることが確認できる。塑性域は亀裂先端から粒界へ遷移しているので、亀裂先端近傍の塑性変形能は失われず、破壊靱性値を向上させることが可能である。

3.2 界面亀裂

つぎに図6に示す界面亀裂について検討する。粒界は同じ $\Sigma 15$ 粒界である。原子の色は引張方向の垂直応力を意味している。図6 (a) に示すように、まず亀裂先端に応力集中場が形成されていることが確認できる。その後、図6 (b) に示すように、界面亀裂前方の粒界転位が連続的に放出されることが確認できる。このとき、当初亀裂先端に形成していた応力集中場が、粒界からの転位放出に伴い右側に移動していることがわかる。また、粒界から転位を放出することで、放出後の粒界構造は $\Sigma 11$ 粒界になり、粒界方位差が変化する。このことから、転位を放出する前後の粒界の境界には、先ほどと同様に回位が形成される。そして、この回位により亀裂先端は遮蔽される。さらに、転位を放出後の粒界のエネルギーは減少するため、劈開破壊しにくい粒界に遷移していることになる。

以上の結果より得られた、破壊靱性を向上させるために必要な粒界の役割は以下の通りである。まず粒界は転位源として機能し、そして粒界構造が遷移することである。この遷移により、亀裂先端の力学場に対する遮蔽場を粒界領域に形成することができる。実験の超微細粒材の亀裂近傍でこのような現象が生じているかは今後の検討課題であるが、原子シミュレーションにより見出された粒界を介した塑性現象のメ

カニズムは、粒界工学¹⁴⁾において有意義な知見となることが期待できる。

4 パーライト鋼の延性特性に対する異相界面の役割

パーライト鋼は伸線加工に伴い、その強度を効率良く向上させることが可能であるが、加工まま材は延性特性が著しく減少する。このとき、セメンタイト分解が生じており、炭素濃度がセメンタイト/フェライト界面近傍で緩やかに変化している。例えば、セメンタイトの炭素固溶限は25 at%であるが、線引加工すると17 at%まで減少し、炭素がフェライトに溶け出している¹⁵⁾。つまり異相界面は非平衡状態にあると推測できる。一方で、この材料を焼鈍することで、降伏応力がやや低下するものの、延性特性が改善することが報告されている¹⁶⁾。このとき、セメンタイト分解は回復しているため、異相界面は平衡状態に戻っていると推測できる。積層間隔は焼鈍により大きく変化していないので、パーライト鋼の延性特性には、異相界面の構造変化が密接に関与していると考えられる*。

そこで、まず、一般的で単純な2次元三角形格子を用いて、積層構造モデルの強度と延性の関係に対する異相界面の役割を調査する¹⁹⁾。つぎに、セメンタイト構造を表現可能な原子間ポテンシャルが近年提案されているので、それを用いたセメンタイト/フェライト異相界面近傍の塑性現象に対する最近の取り組みを紹介する。

4.1 延性・脆性特性を示す仮想材料の設計

2次元三角格子の仮想材料を表現するために、単純な2体力ポテンシャルである shifted-force Morse ポテンシャル ϕ

* さらに巨視的な視点では、フェライトに挟まれたセメンタイトの塑性変形能力が重要である。近年、微細マーカーを用いた実験観察により室温下の引張変形においてパーライト鋼中のセメンタイトは明確な塑性変形を示すことが報告されている¹⁷⁾。そして、セメンタイトが安定した塑性変形を示すためには、フェライトの高い降伏応力と高い加工硬化率が必要であることが連続体解析により提案されている¹⁸⁾。

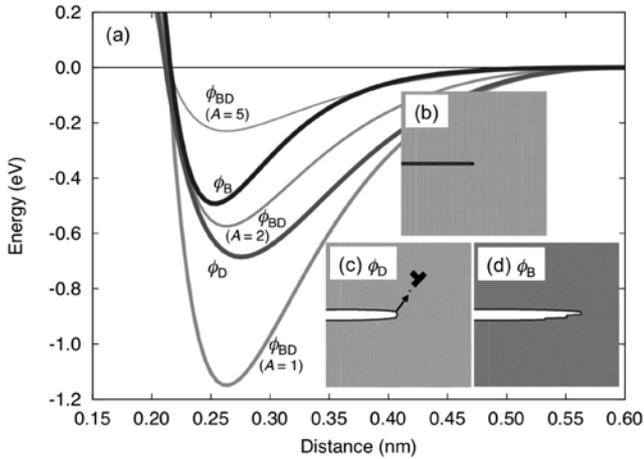


図7 (a) 仮想材料を表現するポテンシャル¹⁹⁾。φ_Dは延性材料、φ_Bは脆性材料。φ_{BD}は異相界面の相互作用。(b) 亀裂の初期状態。(c) (d) 延性材料と脆性材料の亀裂先端の塑性現象

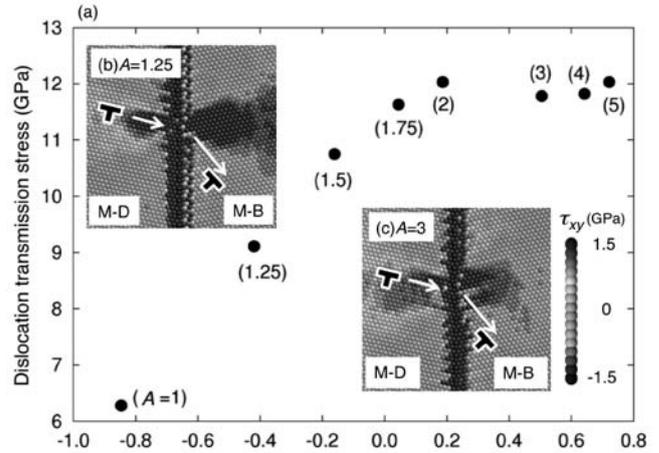


図8 異相界面を転位が通過するために必要な応力¹⁹⁾。界面結合力が強いほど、容易に異相界面を通過できる

(r) を用いる。この関数形状を、材料固有の特性を見積もれる $\mu b / \gamma_s$ の値に基づいて決定する (μ : 剛性率、 b : バーガースベクトル、 γ_s : 表面エネルギー)。一般的に $\mu b / \gamma_s$ が 10 より大きいと脆性的であり、10 より小さいと延性的であることが知られている²⁰⁾。今回は2つの仮想材料DとBを図7(a)に示すように設計し、それぞれの $\mu b / \gamma_s$ は 5.7 と 17.3 となった。

図7(b)(c)(d)に設計した仮想材料に対して、亀裂を含む単結晶モデルを作成し、それらに対する引張変形解析の結果を示す。図7(c)は仮想材料Dであり、転位が亀裂先端から放出され鈍化されていることが確認できる。図7(d)は仮想材料Bであり、亀裂が劈開破壊し進展していることが確認できる。このように、設計した仮想材料DとBは、それぞれ延性、もしくは脆性的な特性を有していることが確認できる。この仮想材料DとBを積層化することにより、積層構造体の延性特性に対する異相界面の役割を調査する。

4.2 転位が異相界面を通過する現象

異相界面近傍の原子間相互作用 $\phi_{BD}(r)$ を、単純な複合則 ($\phi_B(r) + \phi_D(r) / A$) により表現する (図7(a) 参照)。ここで、 A は 1 から 5 を設定し、 A が小さいほど異相界面の結合力は大きくなる。

図8(a)に延性相から脆性相に向けて、転位が異相界面を通過するために必要な応力を示す。横軸は、各相の表面エネルギーで正規化した異相界面エネルギーである。異相界面の結合力が小さくなるほど (A が大きくなるほど)、転位通過が困難になることが理解できる。

異相界面の結合力と転位通過に必要な応力の関係は、以下に示す2つの現象が関与していると理解できた。1つ目の現象は、異相界面に侵入した転位芯の分解である。異相界面の

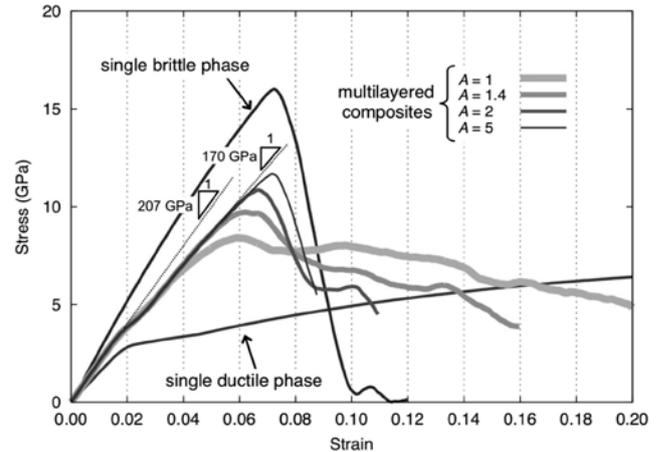


図9 異相界面結合力の異なる積層構造体の応力—ひずみ曲線¹⁸⁾。界面結合力が強いほど(界面の塑性変形能力が高いほど)、高延性を示す

結合力が小さくなるほど、異相界面に侵入した転位の芯構造は分解するため (図8(b)(c) 参照)、異相界面を通過させるためには、転位芯を再構成する必要が生じる。2つ目の現象は、異相界面構造の分解である。異相界面の結合力が大きい場合、延性相に方位差を有する粒界と延性/脆性相の間に方位差を有さない境界の2つに分解される。このとき、転位の通過抵抗は、延性相内の粒界を通過する抵抗力に支配されることになる。

4.3 積層構造体の強度と延性の関係

図9に各仮想材料DとBの応力ひずみ曲線と、2つの仮想材料により構成された積層構造体の応力ひずみ曲線を示す。積層構造体中に存在する異相界面の結合力は A により制御する。初期欠陥として、脆性相には初期亀裂を1個、延性相には転位対を8個予め導入している (図10(a) 参照)。界面結合力

が小さくなるほど、積層構造体のピーク応力は大きくなる
ことが確認できるが、早期に破断している。これに対して、界
面結合力が大きくなると、ピーク応力は少し減少するが、延
性特性が向上していることが確認できる。

図10に積層構造体における欠陥の発展を示す。図10 (a)
に示すように全てのモデルにおいて、まず延性相に導入した
転位対が運動を開始し、図10 (b) に示すように異相界面に
侵入していることが理解できる。この後の欠陥の発展が異相
界面の結合力に応じて変化する。異相界面の結合力が小さい
場合 (A=5)、異相界面から転位を放出することが困難である
ため、脆性相の弾性ひずみエネルギーを解放することができ
ず、初期亀裂に対する応力拡大係数が増加し続けてしまう。
結果として図10 (d) に示すように脆性相中の亀裂が進展し、

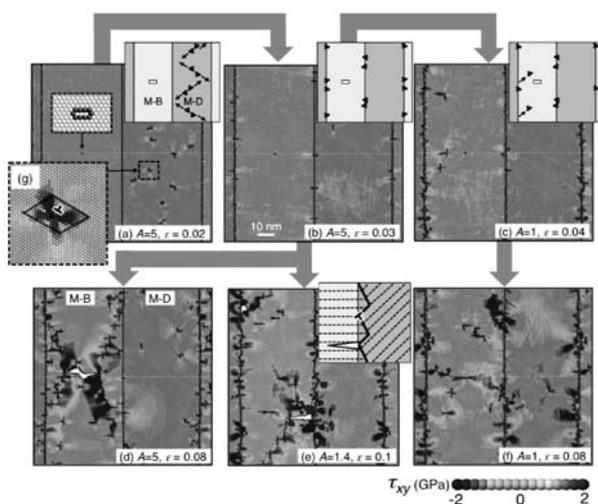


図10 積層構造体における欠陥構造の発展¹⁹⁾。最初の塑性変形は延
性材料から生じる。異相界面の特性に応じて、異相界面に侵入
した転位の脆性層への通過抵抗力が変化し、結果的に脆性層
の破壊と密接に関係する

早期に破断することになる。これに対して異相界面の結合力
が大きい場合 (A=1)、図10 (c) に示すように早期に異相界面
から転位を放出することができ、脆性相に対して転位を供給
していることが確認できる。そして、図10 (f) に示すように
脆性相は安定的に塑性変形を生じ、積層構造体として延性特
性が向上していることが理解できる。しかし、異相界面の結
合力が少し低下する場合 (A=1.4)、異相界面を転位が通過す
るが、そのときに異相界面には残留バーガースベクトルが生
じる。このとき、この幾何学的なミスフィットを緩和できな
い場合、図10 (e) に示すように界面から亀裂が生じ、延性特
性が低下する。

以上の単純な計算結果より、積層構造体が高強度・高延性
を実現させるために異相界面に必要な2つの条件が得られ
た。一つ目の条件は、脆性相の安定な塑性変形を可能にする
ために必要な、異相界面の十分な転位供給能力である。二つ
目の条件は、転位放出後に異相界面に生じる幾何学的なミス
フィットを緩和できる能力である。

今回の計算結果とこれまでに報告されている実験結果を比
較すると、セメント分解が生じた伸線加工まま材の異相
界面の塑性変形能力は低く、セメント分解が回復した焼
鈍材の異相界面の塑性変形能力は高いことが推測できる。

4.4 実際の結晶構造を有した異相界面構造

上記の単純三角形格子モデルで示したように、異相界面の
役割が積層構造体の力学特性に強く影響を与えることが確
認できた。実際の異相界面構造は、弾性ひずみエネルギーと
欠陥エネルギーのバランスに応じて、整合界面、半整合界面、
もしくは非整合界面のいずれかとなり、界面転位が存在する
場合は、異相界面は転位源として機能する可能性がある。そ
こで、実際の α -Fe と Fe_3C の結晶構造から構成される異相

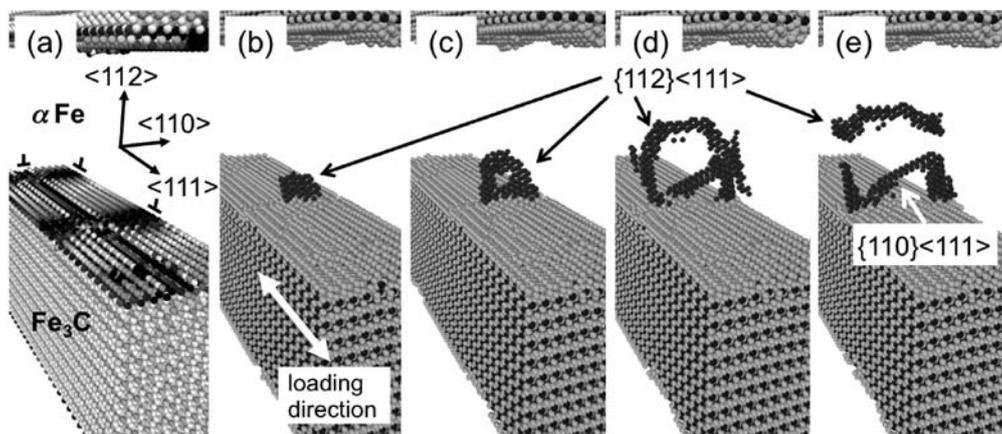


図11 フェライト・セメントの半整合異相界面 (Bagaryatsky の方位関係)。(a) 界面転位の分布 (界面領域の
ポテンシャルエネルギー分布)。(b) - (e) 界面転位を起点とした α -Fe への転位の放出

界面近傍の塑性現象に対する検討を紹介する。原子間ポテンシャルにFe-C二元系Modified-EAMポテンシャル²¹⁾を用い、オープンソースであるLAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)²²⁾で計算を行う。ここでは、Bagaryatskyの結晶方位を採用し²³⁾、格子ミスフィットにより発生する弾性ひずみエネルギーをほぼ除去するために界面転位を導入する。図11 (a) に界面に導入した界面転位を示す。 α -Feを構成する原子は表示していない。ここで、原子の色は、完全結晶状態からのポテンシャルエネルギーの変化量を意味している。全方向に周期境界条件を適用しており、ラメラの間隔(α -Feと Fe_3C の合計)は14nmである。解析温度は1Kである。この半整合界面に対して、 $\langle 111 \rangle$ の方向に引張変形を加えた結果を図11 (b) から図11 (e) に示す。 α -Fe中でbcc構造と識別されない原子を濃色で示す。また Fe_3C 中で濃色の原子はC原子を意味している。 $\langle 110 \rangle$ 、 $\langle 111 \rangle$ 方向の界面転位の交差点近傍から $\{112\}$ $\langle 111 \rangle$ の転位が生じていることが確認できる。また、同時に $\{110\}$ $\langle 111 \rangle$ の転位も起動している。また、今回の計算では、異相界面を起点とした最初の転位放出は、 α -Feに向かって生じており、 α -Feと Fe_3C の塑性変形量が異なることがわかる。このことは応力分配の発生を意味している。伸線加工まま材と焼き鈍し材は、 α -Feと Fe_3C 内の内部応力状態が異なるため¹⁶⁾、異相界面構造にも違いがあることが推測できる。先述したセメントイト分解に加えて、界面に存在する界面転位がパーライト鋼の力学特性に及ぼす影響は重要であるため、今後さらに検討していく。

5 おわりに

本稿では、転位と粒界の相互作用に関する原子シミュレーションの結果を紹介した。また、それに基づいて、ナノスケール構造を有する結晶性材料が示す特異な力学特性の発現メカニズムについて検討を行った。このように原子シミュレーションは、(少なくとも著者には) 容易に想像できない「膨大な自由度の中に潜む宝物(美しい格子欠陥の発展)に光を照らす思考実験」を行える優れた道具である(と著者は信じている)。本稿を通じて、原子シミュレーションに(色々な意味で)関心を持っていただき、原子シミュレーションは格子欠陥の相互作用を研究する一つの道具になりうると期待して頂けると幸いである。

最後に、本研究は、文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「バルクナノメタル」と(独) 科学技術振興機構(JST)による産学共創基礎基盤研究「ヘテロ構造制御」の支援を受けて行われたものである。

参考文献

- 1) Y.Mishin, D.Farkas, M.J.Mehl and D.A.Papaconstantopoulos : Phys.Rev.B, 59 (1999) , 3393.
- 2) T.Shimokawa and S.Kitada : Mater.Trans., 55 (2014) , 58.
- 3) D.Hull and D.J.Bacon : Introduction to Dislocations, fourth ed., Butterworth Heinemann, (2001) , 150.
- 4) J.P.Hirth and J.Lothe : Theory of Dislocations, 2nd ed., McGraw-Hill, New York, (1982) , 752.
- 5) R.O.Scattergood and D.J.Bacon : Acta Metall., 30 (1982) , 1665.
- 6) A.J.E.Foreman : Philos.Mag., 15 (1967) , 1011.
- 7) T.Shimokawa : Phys.Rev.B, 82 (2010) , 174122.
- 8) T.Tsuru, Y.Aoyagi, Y.Kaji and T.Shimokawa : Mater. Trans., 54 (2013) , 1580.
- 9) M.Tanaka, K.Higashida, T.Shimokawa and T.Morikawa : Mater.Trans., 50 (2009) , 56.
- 10) A.Giannattasio, M.Tanaka, T.D.Joseph and S.G.Roberts : Physica Scripta, T128 (2007) , 87.
- 11) R.Thomson : Physics of fracture, Solid State Physics, Vol.39, Academic, New York, (1986)
- 12) T.Shimokawa, M.Tanaka, K.Kinoshita and K.Higashida : Phys.Rev.B, 83 (2011) , 214113.
- 13) A.E.Romanov and V.I.Vladimirov : Disclinations in crystalline solids, in Dislocations in Solids, Vol.9, ed.by F.R.N.Nabarro, North Holland, Amsterdam, (1992)
- 14) T.Watanabe and S.Tsurekawa : Acta Mater., 47 (1999) , 4171.
- 15) Y.J.Li, P.Choi, S.Goto, C.Borchers, D.Raabe, and R.Kirchheim : Acta Mater., 60 (2012) 4005.
- 16) Y.Tomota, P.Lukas, D.Neov, S.Harjo and Y.R.Abe : Acta Mater., 51 (2003) , 805.
- 17) M.Tanaka, Y.Yoshimi, K.Higashida, T.Shimokawa and T.Ohashi : Mater.Sci.Eng.A, 590 (2014) , 37.
- 18) T.Ohashi, L.Roslan, K.Takahashi, T.Shimokawa, M.Tanaka and K.Higashida : Mater.Sci.Eng.A, 588 (2013) , 214.
- 19) T.Shimokawa, T.Oguro, M.Tanaka, K.Higashida and T.Ohashi : Mater.Sci.Eng.A, 598 (2014) , 68.
- 20) I.-H.Lin : J.Mater.Sci.Lett., 2 (1983) , 295.
- 21) L.S.I.Liyanage, S.G.Kim, J.Houze, S.Kim, M.A.Tschopp, M.I.Baskes and M.F.Horstemeyer : Phys.Rev.B, 89 (2014) , 094102.
- 22) LAMMPS, homepage : <http://lammps.sandia.gov>.
- 23) Y.A.Bagaryatsky : Dokl.Akad.Nauk SSSR, 73 (1950) , 1161.

(2014年7月15日受付)